「第2近接力と1次元格子の振動」へのコメント

京大・理　石 井 一 成

（9月19日受理）

最近本誌に掲載された論文において，局在振動が発生するための条件が小暮氏によって検討された。[1] 氏の結論は，「第2近接力をもった1次元格子では，ある限度以上に不純物の質量が軽くないと，不純物1個を含む系に局在振動が発生しない」という少々意外なものであった。我々は以前に，長距離相互作用をもった1次元格子の振動を扱った際に，局在振動発生の条件が1次元では相互作用の型によらないことを注意しておいた。[2]

小暮氏の結果は我々の注意と矛盾するように見える。しかし，これは実は，氏の条件が単なる局在振動発生の条件[3]ではなく，さらに別の要請が満足されるための条件であったことによる。即ち，小暮氏の論文の記号で言えば，$\omega_L^2 = 4(\gamma+\gamma')$ を越える ω^2 をもつ局在振動が発生するための条件が調べられたのである。所で，この振動子系の分散関係は

$$\omega^2(\phi) = 2\gamma(1-\cos\phi) + 2\gamma'(1-\cos 2\phi) < \omega_L^2$$

であるから，ω_L は規則格子の振動数帯の上端（$\tilde{\omega}$ と表わそう）よりも大きい。従って，氏の結論は単なる局在振動の発生条件よりも厳しいものになったのである。

序ながら，以前簡単に注意した局在振動発生の条件を，少し丁寧に一般的に述べておこう。局在振動数は

$$(M-M')\,\omega^2\, g(0;\omega^2) = 1,$$

$$g(0;\omega^2) = \frac{1}{2\pi M}\int_0^{2\pi} \frac{d\phi}{\omega^2-\omega^2(\phi)}$$

を満足する $\omega \geqq \tilde{\omega}$ なる解である。$\omega^2 g(0;\omega^2)$ が $\omega \geqq \tilde{\omega}$ では ω の単調非

増加函数であることを考えると，求める条件は

$$M - M' > \lim_{\omega \to \tilde{\omega}+0} \frac{1}{\omega^2 g(0;\omega^2)}$$

となる。この条件は $g(0;\omega^2)$ の $\omega \to \tilde{\omega}+0$ での振舞い，従って，$\omega^2(\phi)$ が最大値 $\tilde{\omega}^2$ を取る点 ϕ_L の近傍での $\omega^2(\phi)$ の性質によって決定される。例えば，第N近接原子までとフック・バネで結合されている格子系の場合には

$$\omega^2(\phi) = \sum_{n=1}^{N} r_n (1 - \cos n\phi)$$

であって，$\omega^2(\phi)$ は $\phi = \phi_L$ で解析的である。$\phi = \phi_L$ のまわりで展開すると

$$\omega^2(\phi) = \tilde{\omega}^2 - \sum_{n=2}^{\infty} C_n (\phi - \phi_L)^n$$

となり，$C_2 \geq 0$ である。従って，$\phi - \phi_L = x$ と置くと，適当な $A^2 > 0$ と十分小さな $\varepsilon > 0$ に対して

$$\omega^2(\phi) \geqslant \tilde{\omega}^2 - A^2 x^2 \qquad (|x| < \varepsilon)$$

が成立する。これを用いると，

$$g(0;\tilde{\omega}^2 + \Omega^2) > \frac{1}{2\pi M} \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \frac{dx}{A^2 x^2 + \Omega^2}$$

$$= \frac{1}{\pi M A \Omega} \tan^{-1} \frac{A\varepsilon}{\Omega}$$

$$\therefore \lim_{\omega \to \tilde{\omega}+0} g(0;\omega^2) = \infty$$

を得る。$N \to \infty$ の場合にも，相当広い $\{r_n\}$ の型に対して（例えば $\sum_{n=1}^{\infty} |r_n| < \infty$ を満足する $\{r_n\}$），同様な議論が成立する。従って，1次元格子では $M' < M$ でありさえすれば，相互作用の型によらず，局在振動が発生する。

参考文献

1）小暮陽三，物性研究，<u>12</u>（1969），327.

2）K. Ishii, Prog. theor. Phys. <u>39</u>（1968），593.

3）　第2近接力までを含む1次元格子における局在振動発生の条件は

M. S. Seshadri，ZAMM 45 (1965)，217　　で調べられている。